



TITLE:

量子統計力学の基礎付けについて (量子解析におけるミクロ・マクロ 双対性)

AUTHOR(S):

杉田, 歩

CITATION:

杉田, 歩. 量子統計力学の基礎付けについて(量子解析におけるミクロ・マクロ双対性). 数理解析研究所講究録 2006, 1507: 147-159

ISSUE DATE:

2006-07

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/58541>

RIGHT:

量子統計力学の基礎付けについて

大阪市立大学工学部応用物理学科

杉田 歩

(Osaka City University, Ayumu Sugita)

概要

マクロな孤立有限量子系において、ミクロカノニカル平均の使用をどのように正当化するか、という問題を考える。マクロ系で実際に観測される物理量は、比較的少数個の局所物理量の積、及びそれらの和、という形に書けることに注目し、それらの物理量のみ注目する限り、圧倒的大多数の状態はミクロカノニカル平均と区別がつかないことを示す。

1 イントロダクション

平衡統計力学の基礎付けについては、これまで様々な試みが成されているが、いまだ誰もが認めるような決定版は存在していない。

まず、考え方を整理するために、例として多数の粒子が詰められている箱と、その箱の中を半分に分ける仮想的な仕切りを考えよう (図 1)。平衡状態では、ほぼ半数の粒子が仕切られた箱の片側に入る。この結果の説明としては、「多数の粒子を 2 つの箱に分けて入れる場合、ほぼ半数ずつに分けて入れる場合の数のほうが、個数に偏りがある場合の数よりはるかに多いから」ということで多くの人は納得するのではないだろうか？そして、この結果を得るためには、ダイナミクスについての強い仮定はいらない。例えば、各粒子が相互作用しない理想気体的な場合を考えると、この系は可積分であるが、それでも、よほど特殊な初期条件をとらない限り、ほぼ確実に粒子数は半々に分かれるだろう。ここでの見方をまとめると、

(箱の片側に入っている粒子の数のように) 一部の物理量に注目した場合、
圧倒的大多数の状態が同じ値をとる (1)

ということが平衡状態が実現されるための最も本質的な条件であり、これに比べればダイナミクスの詳細はさほど重要ではない。ということである。

一方、平衡分布をエルゴード性と時間平均を使って導く議論は、よく教科書等でも使われている。しかし、この議論は非常に問題がある。箱の中の粒子の例に戻って、系がエルゴード的になるためにはどれぐらいの時間が必要であるか考えよう。(最も強い意味での) エルゴード性とは、全ての物理量について時間平均と等エネルギー面上のアンサンブル平均が等しい、という性質であるが、これが満たされるためには、相空間の等エネルギー面上を軌道が一様かつ稠密にうめつくす必要がある。これが近似的にでも満たされるためには、時間発展の過程で系はある程度の誤差の範囲内で全ての状態をとらなければならない。箱の中の粒子の例で言えば、 N 個の粒子を箱の左右に振り分ける場

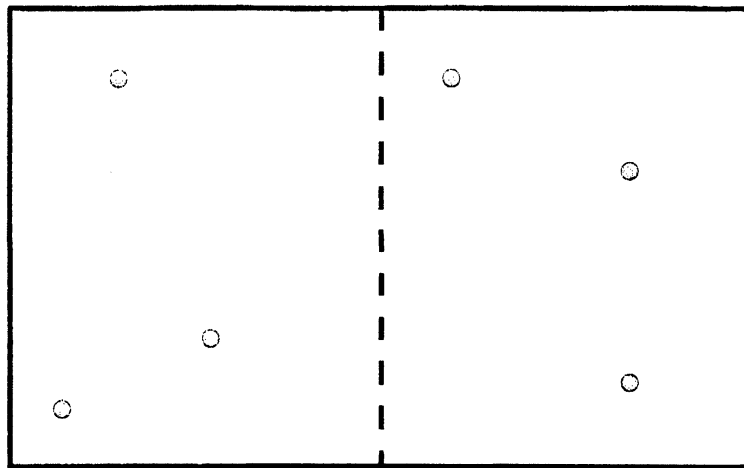


図 1: 仮想的な仕切りを持つ箱の中に、多数の粒子をばら撒く。

合の数は 2^N であり、マクロな系ではこれは極端に大きな数になる。一方、箱の中の仮想的な面を通り過ぎる粒子の数は、気体の標準状態では 1cm^2 1秒あたりアボガドロ数 N_A 個ぐらいのオーダーであり、粒子1個の位置を入れ替えるのに必要な時間はこの逆数程度である。従って、1molの標準状態の気体で全てのパターンが尽くされるのにかかる時間は最低でも $2^{N_A}/N_A$ 秒程度となり、もちろんこれは宇宙年齢よりはるかに長い。つまり、たとえ系が数学的な意味でエルゴード性を持っていても、我々が実際に観測を行う時間スケールでエルゴード性が成り立つことはないので、エルゴード性を用いてミクロカノニカル分布の使用を正当化するのは物理的には間違いである。

量子系においては、さらに状況は悪い。量子状態の時間発展は、エネルギー固有状態 $\{|E_j\rangle\}$ を使って

$$|\psi(t)\rangle = \sum_j c_j e^{-iE_j t/\hbar} |E_j\rangle \quad (2)$$

と書けるので、 $\hat{P}_j \equiv |E_j\rangle\langle E_j|$ というエルミート演算子を定義すると、

$$\langle\psi(t)|\hat{P}_j|\psi(t)\rangle = |c_j|^2 \quad (3)$$

となって、 \hat{P}_j の期待値は保存する。従って、初期状態における期待値がアンサンブル平均からずれていれば、無限に長い時間平均をとってもこの量は決してアンサンブル平均と一致せず、明らかにエルゴード性は成り立たない。

通常のエルゴード性を使った議論の問題点は、「全ての物理量」についての議論を行う点である。普通、我々が実験なり数値シミュレーションなりで系が平衡に達したと判断する時、我々は決して全ての物理量をチェックしたりしない。普通はいくつかの特に注目している物理量だけを見て、それらが時間的に変化しなくなった時に、系が平衡に達したと判断する。もし本当に全ての物理量を監視していたら、系は決して平衡には達しないだろう。エルゴード性を使った議論では、全ての物理量を相手にしてしまった結果、天文学的に長い時間で平均を取るという非現実的な操作を行うことが必要になったのである。

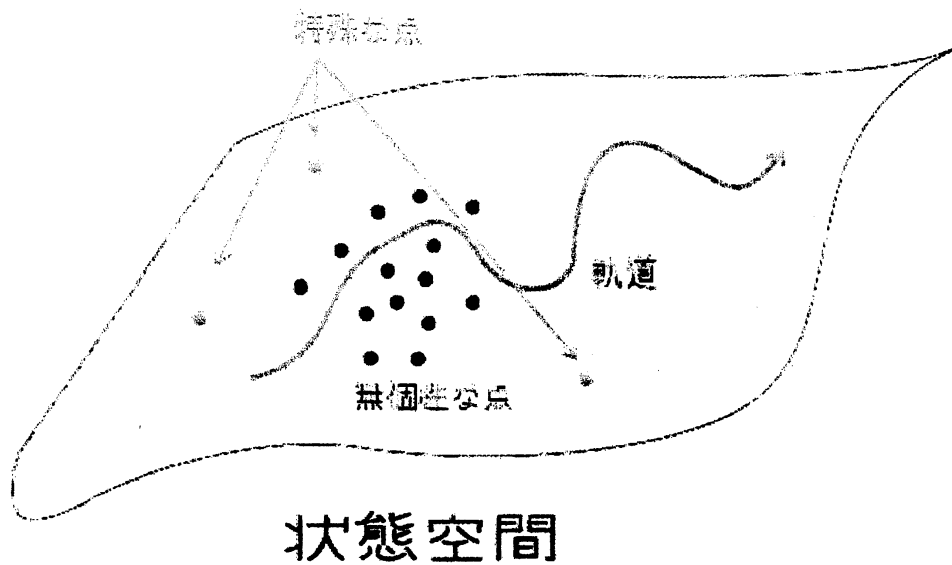


図 2: 状態空間の中には、他の点と区別がつかないような無個性な点が圧倒的に多く、特徴的な点はごくわずかしかない。時間発展の過程で、系が無個性な点ばかりを通過する場合は、系は平衡に達したと見なされる。

この論文では、熱平衡が成立するための本質的理由を、(1) のように考える。しかし、その場合は、注目する物理量の集合をどのようにとるかをきちんと定義しなければならない。箱の中の粒子の例で言えば、注目する物理量は、箱の片側に入っている粒子の個数のような単純なものだけではなく、その他の様々な空間的配置を考える場合もあるだろうし、運動量の分布に注目することも、また粒子の位置の相関に注目することもあるだろう。そして、どの物理量に注目するかによって熱平衡の定義が変わるようであっては困る。従って、考える物理量の集合は

通常考慮される物理量を全て含む (4)

ようなものでなくてはならない。さらに、(1) が成立するためには、考える物理量の集合は

全物理量の集合と比べて、十分に小さい (5)

という条件を満たすものでなくてはならない。(4) と (5) の両方を満たす集合を取るのは少し厄介な問題である。しかし、量子系では、ある意味で古典系よりも独立な物理量のはるかに多い¹ので、これらの条件を満たす集合をとるのは古典系よりもずっと楽になる。これが、この論文の目の付け所である。

一部の物理量だけに注目した時、(1) が成り立っているとすると、時間発展の過程のほとんどの時間において、系は他の状態と区別のつかない、無個性な状態にあるだろう。 その場合、系はあたかも時間的に変化しないように見えるので、平衡状態にあるとみなされる (図 2)。この描像で考えると、系が熱平衡に達するために、ダイナミクスに関する強い仮定は不要であることがわかる。例えば、エルゴード性は、系の軌道が状態空間を一様かつ稠密に埋めるという仮定であるが、上の描像だ

¹量子系では、系のサイズに対して、可観測量の空間の次元は指数関数的に増える。一方、古典系では独立な物理量の数は系のサイズに比例してしか増えない。

と、軌道が相当偏った走り方をしているにもかかわらず熱平衡に達することが出来る。逆に、熱平衡に到達しないような系を作ろうとすると、時間発展の過程で特殊な点をうまく何度も引っ掛けるようなダイナミクスを作らなければならないわけで、平衡に達する系を作るよりもはるかに難しい。例えば、注目している物理量の中に保存量があれば、この量は（初めから平衡値にセットしておかない限り）平衡値へ緩和しないので、明らかに系は熱平衡に達しないが、たとえ系に保存量があったとしても、それが注目している物理量に入っていない限りは、特に平衡への接近への妨げとなることはない。従って、可積分系のような非常にたくさんの保存量を持つ系が熱平衡に達するとしても、それほど不思議ではない。

以上の議論を踏まえて、この論文の構成を述べよう。まず、§2 では、物理量の期待値を使って量子状態を表示する道具として、ブロッホベクトルを導入する。§3 では、我々が注目する物理量のクラスとして、比較的少数個の局所物理量の積およびそれらの和として書けるものをとる。§4 では、上述の物理量のクラスに注目した時、ある energy shell 内の圧倒的大多数の状態は、その energy shell におけるミクロカノニカル平均と区別がつかないことを、簡単な不等式を使って示す。§5 では、スピン系を例にとって、系が上の描像で熱平衡に達することを数値計算から示す。特に、可積分な場合でも熱平衡への緩和が起こることを示す。

2 量子状態のブロッホ表示

量子系において状態が定まるというのは、全ての物理量の確率分布が定まることである。また、これは、全ての物理量の期待値が定まることと同値でもある。従って、全ての独立な物理量の期待値の集合によって量子状態を表すことができる。この期待値の集合のことを、ブロッホベクトルと呼ぶ。

具体的には、以下のように定義する。系のヒルベルト空間 \mathcal{H} の次元を N^2 とすると、この空間の上のオブザーバブル（トレースレスエルミート演算子）³の空間の次元は $N^2 - 1$ である。この空間における基底 $\{\hat{\lambda}_1, \hat{\lambda}_2, \dots, \hat{\lambda}_{N^2-1}\}$ を取り、Hilbert-Schmidt 内積に対する正規直交条件

$$\text{Tr}(\hat{\lambda}_i \hat{\lambda}_j) = C \delta_{ij} \quad (6)$$

を満たすとしておく。規格化定数 C は、ヒルベルト空間の次元と無関係な定数とするのが普通であるが、ここでは $C = N$ と取ることにする⁴。ある状態のブロッホベクトルは、これらの基底に対する期待値の集合

$$\lambda \equiv (\langle \hat{\lambda}_1 \rangle, \langle \hat{\lambda}_2 \rangle, \dots, \langle \hat{\lambda}_{N^2-1} \rangle), \quad (7)$$

として定義される。また、ブロッホベクトルと密度行列は、以下の関係で結ばれている。

$$\hat{\rho} = \frac{1}{N} \left\{ I + \sum_{i=1}^{N^2-1} \langle \hat{\lambda}_i \rangle \hat{\lambda}_i \right\}. \quad (8)$$

² ヒルベルト空間が無次元の場合でも、実際の物理系では非常に高エネルギーの部分は関係しないので、実質的には有限次元のヒルベルト空間で記述出来る。

³ 単位行列は物理量と見做さないなくてもよいので除外しておくことにすると、他の物理量は、適当にスカラ一行列を引くことによってトレースが 0 になるように選ぶことができる。

⁴ こうしておく、局所物理量の規格化が系のサイズによらなくなるので、系のサイズを変化させるような議論を行う時便利なのである。次節の議論参照。

ブロッホベクトルの空間には、通常の L_2 ノルム

$$\|\lambda\| \equiv \sqrt{\sum_i \langle \hat{\lambda}_i \rangle^2} \quad (9)$$

によって距離を定義するが、これは密度行列の Hilbert-Schmidt ノルムによる距離と定数倍を除いて等しく、

$$\|\lambda_A - \lambda_B\| = \sqrt{N \text{Tr}(\hat{\rho}_A - \hat{\rho}_B)^2}. \quad (10)$$

という関係が成り立つ。

ブロッホベクトルの長さの最大値は $\sqrt{N-1}$ で、状態はこの半径を持つ球の表面または内部の点によって表される。ベクトルの長さが最大の、球の表面にある点が純粋状態を表し、内部の点は混合状態を表す。特に、ゼロベクトルは完全混合状態を表す⁵。

3 物理量のクラスの選択

n 個のサイトから成り、系全体のヒルベルト空間が各サイトの局所的なヒルベルト空間のテンソル積となっているような物理系を考える⁶。局所的なヒルベルト空間の次元を N_s とし、サイト l における局所物理量の基底を $\{\hat{a}_\alpha(l) | 1 \leq \alpha \leq N_s^2 - 1\}$ とする。規格化は、 $\text{Tr}(\hat{a}_\alpha(l)\hat{a}_\beta(l)) = N_s \delta_{\alpha,\beta}$ としておく。 $\hat{a}_0(l)$ はサイト l に作用する単位行列を表すことにしておくと、系全体の物理量の基底は

$$\hat{A}(\{\alpha_l\}) \equiv \prod_{l=1}^n \hat{a}_{\alpha_l}(l), \quad (0 \leq \alpha_l \leq N_s^2 - 1) \quad (11)$$

と書ける。またこの形の基底は

$$\text{Tr}(\hat{A}(\{\alpha_l\})\hat{A}(\{\beta_l\})) = N_s^n \prod_{l=1}^n \delta_{\alpha_l, \beta_l} \quad (12)$$

を満たし、右辺の N_s^n は系全体のヒルベルト空間の次元であるから、前節のブロッホ表示の基底の規格化条件を満たしていることが分かる。

(11) で定義された基底の中で、単位行列でない局所物理量を m 個含むものだけを考え、それらの線形結合で書ける物理量を m 体物理量と呼ぶことにする。また、 m 体以下の物理量の線形結合からなる空間を V_m と表すことにしよう。

全サイト数 n がマクロな数であるとし、 m を、サイト数 n より十分小さいが、マクロな数であるとして、 V_m に注目することにしよう。(実際には、 m はそれほど大きい必要はなく、 m が 1 や 2 でも十分意味のある議論が出来る。) これは、言い換えれば、 $O(n)$ 程度のマクロな個数の点の間の相関を無視することに相当する。

⁵ただし、球の内部の全ての点が物理的に意味のある状態を表しているわけではない。物理的状态の存在範囲については、例えば [1] 参照。

⁶ボソンやフェルミオン等の同種粒子系はこの条件に当てはまらないが、以下で述べる「マクロな個数の粒子間の多体相関を無視する」というアイデア自体は、同種粒子系でも使える。注目する物理量の空間としては、例えば、比較的少数の生成消滅演算子の積と、それらの線形結合で書けるようなものを考えればよい。

この物理量の空間 V_m は、現実的に重要な物理量を全て含んでいると考えられる。例えば、マクロな物理量は相加的であるので、(ある程度大きいスケールで見れば) 局所的な物理量の和で書け、 $O(n)$ 点の相関を含むことはない。例えば、スピン系では、磁化は V_1 、エネルギーは (2 体相互作用を仮定すれば) V_2 に含まれている。また、熱力学的極限 $n \rightarrow \infty$ を考える時は、 m は任意の自然数でよいので、結局局所量の多項式で書けるような物理量は全て考慮してよいことになる。

また、全系を m サイト以下の小さな部分系と残りの部分に分けると、小さな部分系の全ての物理量は V_m に含まれる。熱力学的に正常な系なら、全系のミクロカノニカルアンサンブルから部分系のカノニカル分布が導けるので、 V_m 内の物理量に対してミクロカノニカルアンサンブルの使用が正当化できるのなら、 m 体以下の小さい部分系に対してカノニカルアンサンブルが成り立つことになる。

このように、 V_m は、我々が実際に観測する物理量を全て含むほどに大きい集合であるが、それでも全物理量の空間 V_n よりは遥かに小さい。ここが次節の議論に本質的に重要である。

4 不等式

固有エネルギーが区間 $[E_1, E_2]$ に含まれるエネルギー固有状態で張られるヒルベルト空間を $\mathcal{H}_{[E_1, E_2]}$ と書くことにする。エネルギーがほぼ決まった値を持つようなマクロ系の量子状態は、十分よい近似で、ある小さなエネルギー幅 Δ を持つ energy shell に対応するヒルベルト空間 $\mathcal{H}_{[E, E+\Delta]}$ の元で表せる。

$\mathcal{H}_{[E, E+\Delta]}$ に含まれる状態の中で、典型的な状態はどのようなものか、また、典型的でないような状態はどれぐらいの割合で存在するか、という問題を考えよう。具体的には、エネルギー固有状態 $\{|E_i\rangle\}$ を使って状態を

$$|\psi\rangle = \sum_{i \in S} c_i |E_i\rangle, \quad (S = \{i | E_i \in [E, E + \Delta]\}) \quad (13)$$

と表し、係数の集合 $\{c_i\}$ をランダムにとって、状態の平均及びそこからはずれを考えるわけである。

まず、係数の集合の確率分布を指定しなければならない。分布は energy shell 内のユニタリー変換に対して不変であるべきであることと、波動関数の規格化条件を考慮すると、確率分布は

$$P(\{c_i\}) \propto \delta \left(\sum_{i \in S} |c_i|^2 - 1 \right) \quad (14)$$

の形しかない。複素係数を実数で書き直すと、これは、 $2d - 1$ ($d \equiv \dim \mathcal{H}_{[E, E+\delta]}$) 次元の実球面上の様な確率分布を考えることに等しい。 n 次元球面の面積は $2\pi^{n/2}/\Gamma(n/2)$ であるから、正しい確率分布は

$$P(\{c_i\}) = \frac{\Gamma(d - \frac{1}{2})}{2\pi^{d-1/2}} \delta \left(\sum_{i \in S} |c_i|^2 - 1 \right) \quad (15)$$

となる。この分布から、以下の平均値が容易に計算できる。[2]

$$\overline{|c_i|^2} = \frac{1}{d}, \quad (16)$$

$$\overline{|c_i|^4} = \frac{2}{d(d+1)}, \quad (17)$$

$$\overline{|c_i|^2 |c_j|^2} = \frac{1}{d(d+1)} \quad (i \neq j). \quad (18)$$

ここで、overline は確率分布 (15) によるアンサンブル平均を表す。4 次以下では、これ以外の組み合わせは全て 0 になる。

ある物理量 $\hat{\lambda}$ の期待値の (15) によるアンサンブル平均は、

$$\overline{\langle \hat{\lambda} \rangle} = \frac{1}{d} \sum_{i \in S} \langle E_i | \hat{\lambda}_i | E_i \rangle \quad (19)$$

となり、これは通常のコノニカル分布による平均と同じである⁷。さらに、ある物理量 $\hat{\lambda}$ の、ある状態に対する期待値と、期待値のアンサンブル平均の差を

$$\Delta \langle \hat{\lambda} \rangle \equiv \langle \hat{\lambda} \rangle - \overline{\langle \hat{\lambda} \rangle} \quad (20)$$

と書くことにし、その 2 乗のアンサンブル平均を計算すると、以下の不等式が成り立つ。

$$\overline{(\Delta \langle \hat{\lambda} \rangle)^2} \leq \frac{1}{d+1} |\hat{\lambda}|^2, \quad (21)$$

ここで、 $|\hat{\lambda}|$ は $\hat{\lambda}$ の最大固有値を表す。系のサイズを増やしていくと、エネルギー準位密度は指数関数的に増加するので、物理量 $\hat{\lambda}$ の最大固有値の増加が系のサイズに対してせいぜい多項式程度なら、(21) の右辺は 0 に収束する。これは、マクロな系では、energy shell 内の圧倒的に大多数の状態に対して、 $\hat{\lambda}$ の期待値はミクロカノニカル平均と非常に近いことを示している。

(21) の証明は簡単である。左辺を計算すると、

$$\begin{aligned} & \overline{(\Delta \langle \hat{\lambda} \rangle)^2} \\ &= \overline{\langle \hat{\lambda} \rangle^2} - \left(\overline{\langle \hat{\lambda} \rangle} \right)^2 \\ &= \sum_{i,j,i',j' \in S} \lambda_{i,j} \lambda_{i',j'} \overline{c_i^* c_j c_{i'}^* c_{j'}} - \left(\sum_{i,j \in S} \lambda_{i,j} \overline{c_i^* c_j} \right)^2 \\ &= \frac{1}{d(d+1)} \sum_{i,j \in S} |\lambda_{i,j}|^2 - \frac{1}{d^2(d+1)} \left(\sum_{i \in S} \lambda_{i,i} \right)^2 \\ &\leq \frac{1}{d(d+1)} \sum_{i,j \in S} |\lambda_{i,j}|^2, \end{aligned} \quad (22)$$

⁷量子系におけるミクロカノニカル分布は、「ある energy shell に含まれるエネルギー固有状態が等確率で現れる分布」と定義することがあるが、エネルギー固有状態だけが現れると仮定するのは不自然なので、(15) をミクロカノニカル分布の定義にとるほうが自然だと思う。密度行列は、結局どちらの定義でも同じになるのだが。

ここで、 $\lambda_{i,j} = \langle E_i | \hat{\lambda} | E_j \rangle$ である。また、

$$\sum_{i,j \in S} |\lambda_{i,j}|^2 \leq \sum_{i \in S} \sum_j |\lambda_{i,j}|^2 \quad (24)$$

$$= \sum_{i \in S} \sum_j \langle E_i | \hat{\lambda} | E_j \rangle \langle E_j | \hat{\lambda} | E_i \rangle \quad (25)$$

$$= \sum_{i \in S} \langle E_i | \hat{\lambda}^2 | E_i \rangle \quad (26)$$

$$= d \langle \hat{\lambda}^2 \rangle \quad (27)$$

$$\leq d |\hat{\lambda}|^2. \quad (28)$$

であるから、(23) と (28) を合わせて (21) を得る。

次に、ブロッホベクトルを、 m -体以下の物理量の空間に制限する射影演算子 P_{V_m} を定義する。 V_m の基底は、(11) において、単位行列でない局所物理量が m 個以下であるようなものであるから、その最大固有値は $N_s^{m/2}$ 以下である。従って、以下の不等式が成り立つ。

$$\overline{\|P_{V_m}(\lambda) - P_{V_m}(\bar{\lambda})\|^2} \leq \frac{N_s^m}{d+1} \dim V_m. \quad (29)$$

さらにチェビシェフの不等式を使うと、

$$\text{Prob}(\|P_{V_m}(\lambda) - P_{V_m}(\bar{\lambda})\| \geq k) \leq \frac{N_s^m \dim V_m}{k^2(d+1)} \quad (30)$$

が任意の $k > 0$ について言える。

$\dim V_m$ は、系のサイズ n に対して多項式のオーダー $O(n^m)$ で増加するから、 $n \rightarrow \infty$ の極限で (30) の右辺は 0 に収束する。これは、マクロな系においては、圧倒的大多数の状態が実質的にミクロカノニカルアンサンブル平均と区別がつかないということを意味する。アンサンブル平均と区別できるような状態の割合は、系のサイズに対して指数関数的に減少する。

また、同様の議論で、小さい部分系は非常に高い確率でカノニカル分布になっていることも示せる。 m サイトから成る部分系を A とし、この系に含まれる物理量の空間を V_A とすると、 $\dim V_A = N_s^{2m} - 1$ であるから、ブロッホベクトルの V_A への射影を表す演算子を P_{V_A} とすると、

$$\overline{\|P_{V_A}(\lambda) - P_{V_A}(\bar{\lambda})\|^2} \leq \frac{N_s^m}{d+1} (N_s^{2m} - 1) \quad (31)$$

が成り立つ。これは、密度行列の Hilbert-Schmidt ノルムとブロッホベクトルの距離の関係 (10) を使うと、

$$\overline{\text{Tr}(\hat{\rho}_A - \bar{\hat{\rho}}_A)^2} \leq \frac{N_s^{2m} - 1}{d+1} \quad (32)$$

と書き換えられる。熱力学的に正常な系であれば、小さい部分系の密度行列のアンサンブル平均 $\bar{\hat{\rho}}_A$ は、カノニカル分布に等しいので、(32) は、圧倒的大多数の場合について小さい部分系の密度行列がカノニカル分布になることを示している。

5 具体例

5.1 時間依存スピンモデル

本論文で述べた熱平衡成立のシナリオをおそらく最も分かりやすく示してくれるモデルとして、時間依存のハミルトニアンを持つスピン系を考えよう。具体的には、以下のハミルトニアンを持つ1次元スピン鎖を考える。

$$\begin{aligned}
 H = & J \sum_{l=1}^N \{ \sigma_x(l) \sigma_x(l+1) + \sigma_z(l) \sigma_z(l+1) \\
 & + \sqrt{2} \cos \phi_l \sigma_y(l) \sigma_y(l+1) \} \\
 & - h \sin(\omega t) \sum_{l=1}^n \{ \sin \theta_l \sigma_x(l) + \cos \theta_l \sigma_z(l) \}.
 \end{aligned} \tag{33}$$

これは、論文 [5] で使われたハミルトニアンに時間依存性を入れたものである。 $\sigma_\alpha(l)$ は、 l 番目のサイトにおける α 方向のスピンを表している。最近接スピンの間にのみスピン間相互作用があり、さらに x - y 平面内に強さ $h \sin(\omega t)$ の時間的に変動する外場がかかっている。 y 方向のスピン間相互作用、及び、外場の x - y 平面内の角度は、それぞれ変数 $\{\phi_l\}$ 、 $\{\theta_l\}$ によって決まるが、これらは最初ランダムに決め、一度決めたら変更しないことにしておく。従って、この系のダイナミクスは決定論的であるが、保存量は存在しない。

さて、この系に適当な初期条件を与えて時間発展させ、どのような平衡状態ができるか考える。まず、通常の統計力学の考え方を適用してみよう。この系には保存量がない（エネルギーも保存しない）ので、等重率の原理を仮定すると、ありとあらゆる状態が同じ確率で現れることになり、結果として出来る平衡状態は、完全混合状態 $\hat{\rho} = \frac{1}{2^n} I$ である。また、これをブロッホベクトルで表すとゼロベクトルとなるが、これが全ての状態の等しい重みの平均になっていることは直感的に明らかだろう。

しかし、等重率の原理は、文字通りの意味で正しく成り立っているわけではない。イントロダクションにおいて述べたように、そもそも実際の観測にかかる時間は系が全ての状態を尽くせるほど長くないし、仮に無限に長い時間待ったとしても、全ての状態を尽くすことはできない。これは、イントロダクションの時間依存のない量子系のエルゴード性の議論で、ハミルトニアンの固有状態を、外場の一周期 $T = 2\pi/\omega$ の時間発展演算子の固有状態で置き換えればわかる。展開係数の絶対値の2乗は、周期 T で必ず元に戻るなので、系はエルゴード的になれない。

それなら、統計力学の予測は間違っているのかというと、もちろんそうではない。この系の純粋状態のブロッホベクトルを考えると、このベクトルは、 $4^n - 1$ 次元で、長さの2乗は $2^n - 1$ だから、各成分の2乗の平均的な大きさは $1/(2^n + 1)$ である。我々には、この非常に多次元のベクトルの全体を把握することは不可能で、実際にはごく少数個の成分を見るだけであり、また、各成分はほぼ確実に極めて小さいのだから、このベクトルは現実的にはゼロベクトルと同じに見えてしまう。このように、統計力学の予測は結局は実現される。しかしこれは、何らかの平均操作が行われるたことによるのではなく、我々がマクロ系の持つ全ての情報を把握しきれないことによる粗視化の帰結である。

図3に、ブロッホベクトルの m 体成分 $W_m \equiv \|P_{V_m}(\lambda) - P_{V_{m-1}}(\lambda)\|^2$ のプロットを示した。初期状態には、局所的純粋状態のテンソル積の状態をとる。この場合、 m の小さい部分の成分が比較的大きくなる。特に、一体物理量の部分 W_1 は最大値 n を取る。

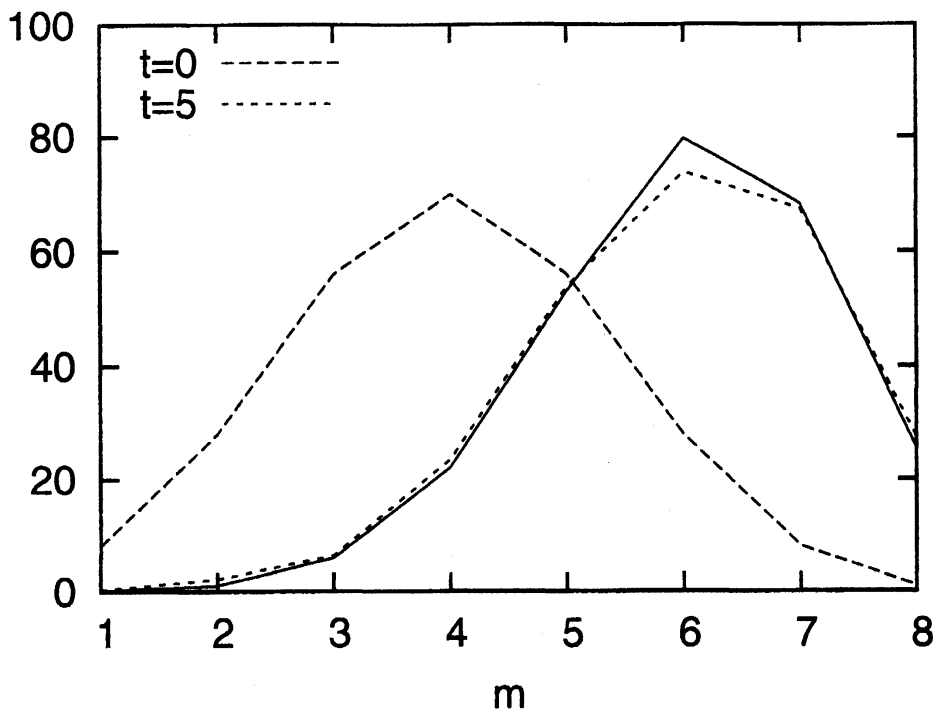


図 3: $n = 8$, $J = \omega = h = 1.0$ の時の W_m のプロット。破線と点線はそれぞれ $t = 0$, $t = 8$ の結果。実線は全ての純粋状態についての平均を表す。

しかし、この状態を時間発展させていくと、グラフは右側にシフトしていく。これは、単純に m が大きい部分のほうがベクトル空間の次元が高いからである。 m 体物理量の次元が $\frac{3^m n!}{m!(n-m)!}$ であるから、全ての純粋状態についての平均は $\overline{W_m} = \frac{3^m n!}{(2^n + 1) m!(n-m)!}$ であり、 W_m は時間発展とともに急速に平均値 $\overline{W_m}$ に近づいていく。このとき、 $m \ll n$ ならば、 W_m の値は指数関数的に小さい。従って、 m が小さい部分の物理量だけを見ている場合には、プロットベクトルはゼロベクトルとほとんど区別がつかない。

5.2 横磁場イジングモデル

次に、1次元横磁場イジングモデル

$$H = \alpha \sum_{l=1}^n \sigma_z(l) \sigma_z(l+1) + \xi \sum_{l=1}^n \sigma_x(l) + \gamma \sum_{l=1}^n \sigma_z(l) \quad (34)$$

を考えよう。このモデルは、 $\gamma = 0$ の時自由フェルミオン系にマッピング可能な可積分系となり、 $\gamma \neq 0$ では非可積分である。この系については、以前の数値計算による研究で、可積分の場合であっても系は熱平衡に達すること報告されている [3, 4]。具体的に見ている量は [3] では磁化であり、[4] では小さな部分系の密度行列であるが、ここではその両者を含むようなもう少し一般的な視点から調べてみる。

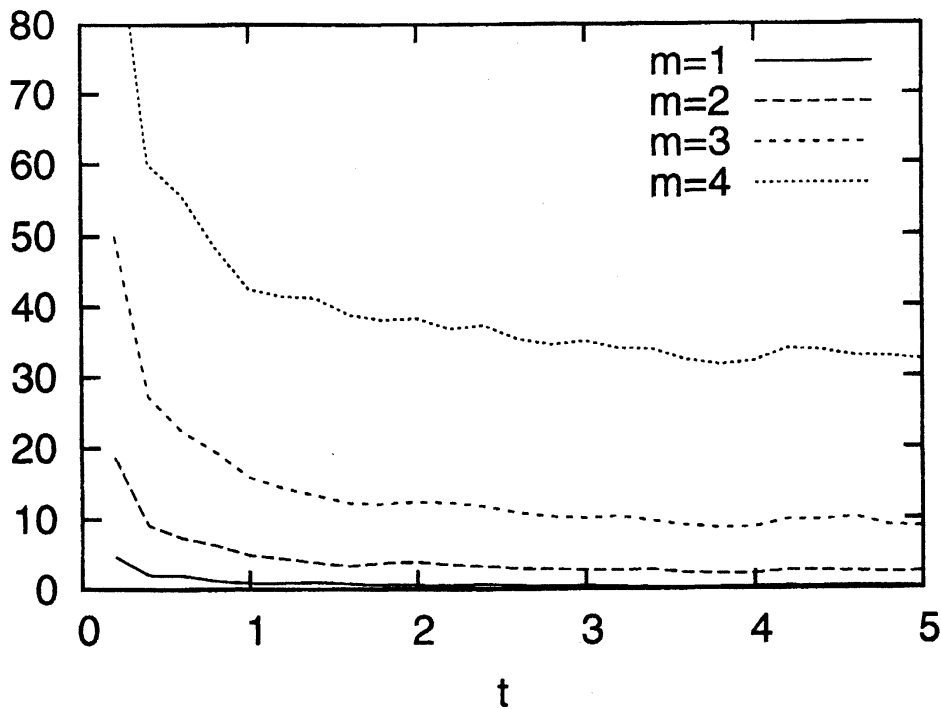


図 4: $n = 8, \alpha = 0.5, \xi = 1.0, \gamma = 0$ の場合の $d_m(t)$ のプロット。 $m = 1$ から $m = 4$ までの場合。初期状態は、左半分が全てスピン上向きで、右半分が全てスピン下向きにとってある。

図 4 は、時刻 t における状態を表すブロッホベクトル $\lambda(t)$ とミクロカノニカル平均 $\bar{\lambda}$ の間の距離を V_m に射影して測ったもの

$$d_m(t) \equiv \|P_{V_m}(\lambda(t) - \bar{\lambda})\| \quad (35)$$

のプロットである。初期状態は局所状態のテンソル積にとってあるのでミクロカノニカル平均から離れているが、 m が小さい場合は時間発展と共に急速にミクロカノニカル平均に近付いていくことがわかる。この図は $\gamma = 0$ の場合であるが、可積分性は特に平衡への緩和を妨げてはいないように見える。

今考えているのは有限系なので、いくら時間発展させても $d_m(t)$ は完全にゼロになることはない。そこで、時間平均

$$\overline{d_m} \equiv \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T d_m(t) dt \quad (36)$$

をとって、系のサイズを変えた時の $\overline{d_m}$ の振る舞いを見してみる。図 5 と図 6 は、 $m = 1$ と $m = 2$ の場合についてのプロットで、図 5 が非可積分、図 6 が可積分の場合である。どちらの場合も系のサイズの増加と共に $\overline{d_m}$ はゼロに近づく。従って、系が可積分の場合も非可積分の場合も、系のサイズが大きければ平衡への接近が見られることが分かる。また、平衡への近づき方も、定性的にはほとんど違いが見られない。これは、[3] の結論と一致している。

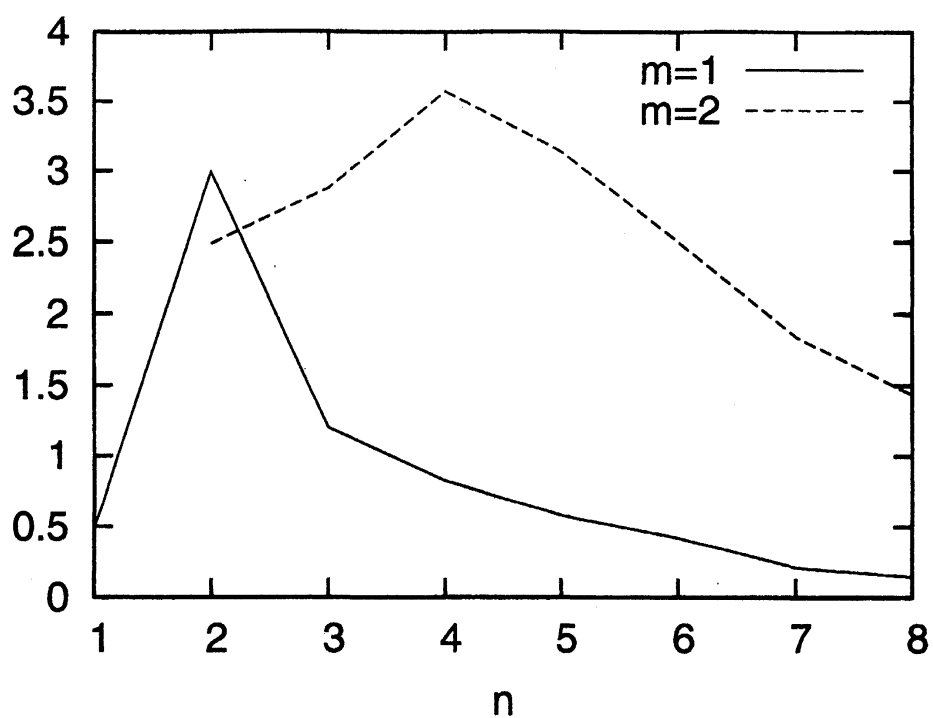


図 5: 系のサイズ n を変えた時の \overline{d}_m のプロット。 $\alpha = 0.5$, $\xi = 1.0$, $\gamma = 0.5$ の場合。

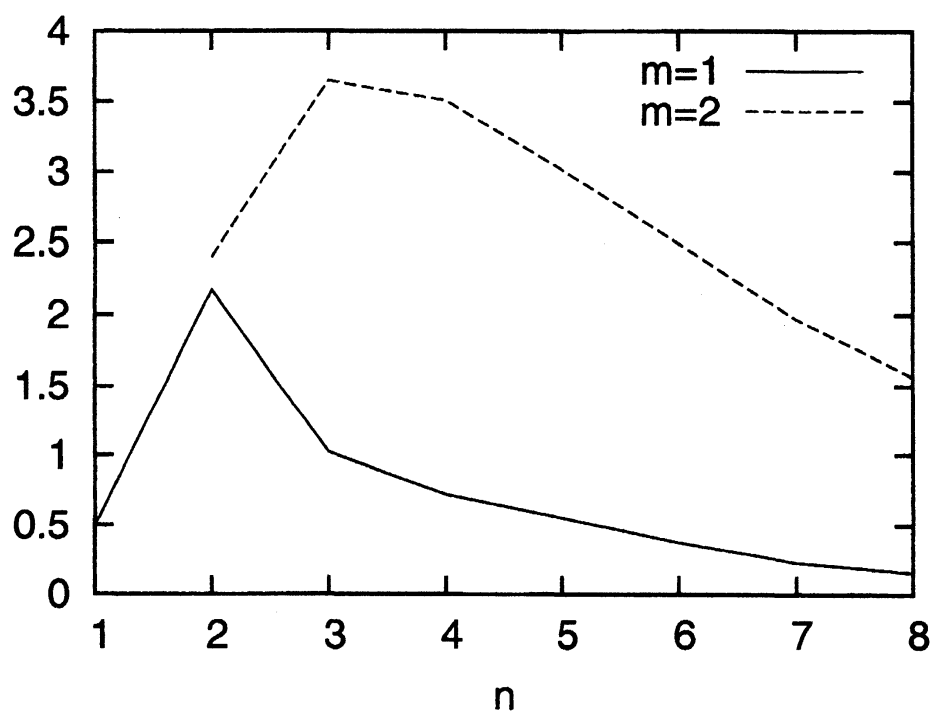


図 6: 同じく、 $\alpha = 0.5$, $\xi = 1.0$, $\gamma = 0.0$ の場合。

参考文献

- [1] G. Kimura, Phys. Lett. A **314** 339 (2003).
- [2] N. Ullah, Nucl. Phys. **58** 65 (1964).
- [3] R. V. Jensen and R. Shankar, Phys. Rev. Lett. **54** 1879 (1985).
- [4] K. Saito, S. Takesue and S. Miyashita, J. Phys. Soc. Jpn. **65** 1243 (1995).
- [5] A. Sugita and A. Shimizu, J. Phys. Soc. Jpn. **74** 1883 (2005).